
TECHNICKÁ UNIVERZITA V LIBERCI

Fakulta mechatroniky a mezioborových inženýrských studií

Studijní program: B2612 – Elektrotechnika a informatika

Studijní obor: 1802R022 – Informatika a logistika

Ohrožení životního prostředí únikem rozpustné látky do vodního toku

**Living environment hazards by hydrosoluble substances
leakage into the lode**

Bakalářská práce

Autor: **Filip Novák**

Vedoucí práce: RNDr. Jan Novák, Ph.D.

Konzultant:

V Liberci 1. 7. 2007

Prohlášení

Byl(a) jsem seznámen(a) s tím, že na mou bakalářskou práci se plně vztahuje zákon č. 121/2000 o právu autorském, zejména § 60 (školní dílo).

Beru na vědomí, že TUL má právo na uzavření licenční smlouvy o užití mé bakalářské práce a prohlašuji, že **s o u h l a s í m** s případným užitím mé bakalářské práce (prodej, zapůjčení apod.).

Jsem si vědom(a) toho, že užít své bakalářské práce či poskytnout licenci k jejímu využití mohu jen se souhlasem TUL, která má právo ode mne požadovat přiměřený příspěvek na úhradu nákladů, vynaložených univerzitou na vytvoření díla (až do jejich skutečné výše).

Bakalářskou práci jsem vypracoval(a) samostatně s použitím uvedené literatury a na základě konzultací s vedoucím bakalářské práce a konzultantem.

Datum

Podpis

Filip Novák

Abstrakt:

Tento text popisuje model vodního toku, do kterého vnikla toxická látka rozpustná ve vodě. Model simuluje vývoj koncentrace této látky v jednotlivých částech toku a pomocí expoziční dávky a probitu vyjadřuje dopady kontaminace na daný živočišný druh.

Aplikací tohoto modelu je program Kontaminace. Program disponuje přehledným uživatelským rozhraním a možností ukládání a načítání různých modelových situací. Výpočtem probitové funkce určujeme pravděpodobnost úhynu daného živočicha. Aplikace počítá s meziročními výkyvy průtoku, výpočty jsou prováděny pro všechny definované průtokové třídy. Z dat pravděpodobností pro jednotlivé třídy je vypočítáván průměr pravděpodobností vážený zastoupením průtokových tříd v roce. Hlavním výstupem programu jsou přehledné grafy.

Praktická ukázka aplikace ukazuje dopady úniku šesti kilogramů NH_3 vniklých do řeky Ploučnice v obci Noviny pod Ralskem, na ryby ve více než dvoukilometrovém úseku řeky.

Program může sloužit k výukovým a studijním účelům. Též může najít uplatnění ve společnostech či institucích zabývajících se přepravou nebezpečných látek.

Klíčová slova: model kontaminace vodního toku, toxická látka rozpustná ve vodě, vývoj koncentrace látky ve vodním toku, pravděpodobnost úhynu organismů ve vodním toku, simulace pomocí počítačového programu

Abstract:

This text describes a model of the lode, where toxic hydrosoluble substance is leaked. Model simulates concentration progress of this substance in different parts of the lode. Impact on given animal species is explained by the help of exposition dose and probit function.

The program Kontaminace uses the model. The program contains user's interface with option of saving and loading different model situations. Application counts with annual flow rate changes, so all calculations are made for all defined flow classes. The program enumerates probabilities of animal species mortality by calculation of probit function for every flow class. From these values the average

probability is derived. The well-arranged graphs describe the main results of computations of the program.

Practical example of application shows 6 kg NH_3 leakage impacts on fishes in the river Ploučnice at the village Noviny pod Ralskem.

The Program Kontaminace can be used for educational purposes. It can be used in companies or institutions involved in hazardous substances transport, too.

Keywords: contamination of a lode model, toxic hydrosoluble substances, progress of concentration in a lode, death probability of organisms in a lode, simulation by a computer program

Obsah:

1	Problematika kontaminace vodního toku látkou rozpustnou ve vodě	12
1.1	<i>Některé základní pojmy</i>	<i>12</i>
1.1.1	Rozpustnost látek	12
1.1.2	Referenční průtok a referenční rychlost toku	12
1.1.3	Distribuce průtoků	12
1.1.4	Koncentrace	13
1.1.5	Toxicita	13
1.1.6	Limitní koncentrace	14
1.1.7	Probit – Probitová funkce	14
1.2	<i>Definice prvků modelu</i>	<i>15</i>
1.2.1	Délka úseku	16
1.2.2	Časový krok	16
1.2.3	Průtok	17
1.2.4	Rychlost	17
1.2.5	Efektivní průřez koryta	17
1.2.6	Objem vody úseku	18
1.2.7	Nultý úsek	18
1.2.8	Ředící poměr a kontrola přetečení úseku	18
1.2.9	Koncentrační pole	19
1.2.10	Dávka	20
1.2.11	Probit	20
1.2.12	Pravděpodobnost úhynu v úsecích	20
1.2.13	Průměrná pravděpodobnost úhynu v úsecích	20
1.3	<i>Očekávané výsledky a výstupy</i>	<i>21</i>
1.3.1	Výstupy	21
1.3.2	Předpokládané výsledky	21
2	Program Kontaminace	22
2.1	<i>Technická stránka aplikace</i>	<i>22</i>
2.1.1	HW a SW požadavky	22
2.1.2	Základní rozčlenění programu	22
2.2	<i>Dokumentace k aplikaci Kontaminace (Manuál)</i>	<i>24</i>
2.2.1	Instalace a spuštění aplikace	24
2.2.2	Úvodní okno	25
2.2.3	Okno Editace vstupních hodnot	25
2.2.4	Karta Model	25
2.2.5	Karta Vodní tok	26

2.2.6	Karta Cizí Látka.....	27
2.2.7	Editor Látek	29
2.2.8	Karta Výpočet.....	30
2.2.9	Okno výpočtů	31
2.2.10	Okno grafů.....	33
2.2.11	Omezení balíku SDL Suite	35
3	Praktická aplikace programu Kontaminace.....	37
3.1	<i>Zadání</i>	37
3.1.1	Čpavek.....	37
3.1.2	Vstupní hodnoty	37
3.1.3	Výpočty	38
3.1.4	Výstupy.....	39
4	Závěr	46
5	Použitá literatura	47

Seznam obrázků:

Obrázek 1. Transformace procent pravděpodobnosti na probity [7].	15
Obrázek 2. Rozdělení vodního toku na úseky po 15 metrech.	16
Obrázek 3. Efektivní průřez koryta – světle modrá plocha.	18
Obrázek 4. Schéma uživatelského rozhraní programu Kontaminace.....	23
Obrázek 5. Úvodní okno aplikace Kontaminace.....	24
Obrázek 6. Okno Editace vstupních hodnot – karta Model.....	26
Obrázek 7. Editace vstupních hodnot – Karta Vodní tok.	27
Obrázek 8. Editace vstupních hodnot – karta Cizí látka.....	28
Obrázek 9. Okno editoru látek.	29
Obrázek 10. Editace vstupních hodnot – karta Výpočty.....	30
Obrázek 11. Okno výpočtů.	32
Obrázek 12. Export tabulek v souboru txt do tabulkového procesoru OO2 Calc	33
Obrázek 13. Okno grafů (koncentrací)	34
Obrázek 14. Tabulka průtokových tříd.	38
Obrázek 15. Koncentrace čpavku v prvním úseku pro 1. a 6. průtokovou třídu.....	41
Obrázek 16. Koncentrace čpavku v šestém úseku pro 1. a 6. průtokovou třídu.	41
Obrázek 17. Koncentrace pro 1. třídu v úsecích 5 a 7.	42
Obrázek 18. Koncentrace pro 1. třídu v úsecích 5 a 17.	42
Obrázek 19. Graf dávek pro průtokovou třídu 1. a 6.	43
Obrázek 20. Graf Pravděpodobností úhynu pro průtokovou třídu 4. a 6.	43
Obrázek 21. Graf průměrné pravděpodobnosti úhynu pro úseky.	44

Seznam tabulek:

Tabulka 1. Část tabulky objemů z tabulkového procesoru Calc.	40
Tabulka 2. Část tabulky pravděpodobností generované programem Calc.	44
Tabulka 3. Část tabulky průměrné pravděpodobnosti generované programem Calc.	45

Přílohy:

CD-ROM přilepený na zadních deskách.

Úvod:

Stále se rozvíjející doprava nejrůznějších nákladů sebou nese krom zvýšené zátěže na životní prostředí i zvýšené riziko havárií. Často jsme z médií informováni o dopravních nehodách, nejčastěji nákladních automobilů, cisteren, převážejících různé látky toxické, nebo jinak nebezpečné. Právě kvůli zvýšené četnosti těchto nežádoucích událostí se také nezdá stávat, že nebezpečný náklad se dostane do okolního prostředí a do místního vodního toku.

Tato práce se zabývá případy, kdy do vodního toku unikne látka rozpustná ve vodě. Cílem je nasimulovat takovou situaci a vyhodnotit dopady na život v postiženém vodním toku.

Tyto příhody se samozřejmě přihodí znenadání a jejich další vývoj závisí na mnoha více méně náhodných faktorech. Například na aktuálním průtoku toku a rychlosti proudu, množství, rozpustnosti a toxicitě uniklé látky, na konkrétním živočišném druhu, který je pohromou zasažen.

Lze si snadno představit, jak se během roku mění množství vody v řekách a říčkách. Je zřejmé, že takového živočicha ve vodě ani tak nezajímá, kolik se toho do řeky vylilo, ale jak se zhoršila kvalita vody, je zřejmé, že nejvýznamnější dopady na život v řece vzniknou při nízkých průtocích, kdy je koncentrace cizí látky v toku nejvyšší. Tím konkrétní organismus dostane největší zásah (expoziční dávku) toxickou látkou.

Hlavní náplní mojí bakalářské práce bylo vytvořit nástroj (počítačový program), který spočítá a vyhodnotí dopady toxického znečištění na živočichy v postiženém toku. Dopady mají být vyjádřené pravděpodobností úhynu daného organismu pro různé průtoky, které se mohou v toku vyskytnout a také průměrnou pravděpodobnost, která vyjadřuje celkové riziko na daném místě pro sledovaný organismus. Nástroj má sloužit hlavně jako demonstrativní a studijní pomůcka, takže jejím hlavním výstupem jsou názorné grafy koncentrací, expozičních dávek, pravděpodobností úhynu a průměrné pravděpodobnosti.

V první kapitole tohoto materiálu se budu zabývat vysvětlováním některých pojmů, definováním prvků modelu, matematicko-fyzikálním popisem modelu a očekávané výsledky.

Ve druhé části podrobněji rozeberu strukturu programu a pokusím se o názornou dokumentaci aplikace.

Třetí kapitola bude věnována praktické úloze pro moji aplikaci. Bude se týkat znečištění řeky Ploučnice v Novinách po Ralskem.

Ve čtvrté, poslední, kapitole bude zhodnocení práce a její reálné možnosti nasazení. Součástí práce je CD s vytvořeným programem, jeho zdrojovým kódem a tímto textem v elektronické podobě.

1 Problematika kontaminace vodního toku látkou rozpustnou ve vodě

Tato kapitola nás seznámí s problematikou úlohy, a nastíní strukturu modelu, způsob a postup řešení úlohy.

1.1 Některé základní pojmy

Uvedu některé pojmy, které s tímto tématem souvisejí pro celkový náhled nad problematikou.

1.1.1 Rozpustnost látek

Rozpustnost látek se definuje více způsoby [3.]. Buďto se jedná o nejvyšší možné množství látky rozpustitelné v daném rozpouštědle, nebo jde o množství látky, pomocí kterého lze vyrobit určité množství roztoku. Samotnou rozpustnost ovlivňuje několik faktorů - rozpouštědlo, rozpouštěná látka, přítomnost dalších látek v roztoku, teplota a v případě plynů i tlak.

Náš model se omezuje na látky, které jsou rozpustné ve vodě. Voda je rozpouštědlo polární, které dobře rozpouští iontové látky. Řadíme mezi ně například většinu solí alkalických kovů a solí amonných, dusitany, dusičnany, chlorečnany, chloristany, octany, sírany.

Pro naše účely předpokládáme, že látka přiteká do toku se úplně rozpustí. Většinou to tedy znamená, že se bude jednat o řeky, ve kterých teče dostatek vody, takže dotace látky nebude znamenat ani významné zvýšení průtoku v korytě.

1.1.2 Referenční průtok a referenční rychlost toku

Referenční průtok je vstupní hodnota, kterou volíme podle hydrologického údaje Q_{355} . Hodnota Q_{355} představuje minimální hodnotu průtoku, se kterou v odpovídajícím profilu řeky můžeme počítat po 355 dní v roce.

Referenční rychlost je potom rychlost proudu toku právě při takovém průtoku.

1.1.3 Distribuce průtoků

Distribucí průtoků míníme roční rozdělení průtoků do průtokových tříd. Během roku se průtok v řece mění a to často velmi dramaticky. Třeba při jarním tání bývá průtok několikrát vyšší než v obdobích suchého léta. Například na řece Ploučnici v obci Noviny pod Ralskem se průtok běžně pohybuje mezi $0,5 \text{ m}^3/\text{s}$ až do $2 \text{ m}^3/\text{s}$ a v maximech dosahuje téměř $10 \text{ m}^3/\text{s}$ (viz. kapitola 3.)

Pro rozřazení průtoků do tříd musíme mít k dispozici statistiku průtoků během roku pro danou řeku a dané místo. Tu bývá možné získat u příslušného vodohospodářského úřadu. Vhodně si určíme intervaly průtoků a pro každý interval spočítáme počet dní, ve kterých se průtok v řece pohybuje v tomto rozsahu. Třidu pak určuje její popis (např. rozsah průtoků), počet dní v roce s tímto průtokem a průměrný průtok této třídy. Ten je potom použit pro všechny výpočty.

1.1.4 Koncentrace

Veličinu koncentrace budeme používat často. [1.] Defínuje se několika způsoby.

Molární koncentrace (molarita)

$$c_m = \frac{n}{V_c},$$

kde n je látkové množství, V_c objem vzniklého roztoku a jednotka je mol/dm³.

Molální koncentrace (molalita) hmotnostní

$$\mu = \frac{n}{m_r},$$

nebo objemová

$$\mu' = \frac{n}{V_r},$$

kde $m_r - V_r$ je hmotnost, resp. objem rozpouštědla a jednotkou je mol/kg, resp. mol/m³.

Hmotnostní koncentrace

$$c = \frac{m_l}{V_r},$$

kde m_l je hmotnost rozpouštěné látky a jednotkou je kg/m³.

Pro naše potřeby je nejlépe použitelná a nejvíce vypovídající poslední možnost. Navíc zanedbáme zvýšení objemu roztoku o objem rozpouštěné látky.

1.1.5 Toxicita

Toxicita látky se určuje pomocí různých ukazatelů [6.]. Jedním z ukazatelů toxicity je údaj smrtící dávky LD a smrtící koncentrace LC. Předkládám překlad popisu těchto údajů ze stránek kanadského centra pro zdraví a bezpečnost [9.].

LD („lethal dose“) stanoví smrtící dávku. LD50 je množství látky, podáno celé najednou, které způsobí smrt 50% (jedné poloviny) skupiny pokusných zvířat. Údaj LD50 je způsob, jak měřit krátkodobý otravný potenciál (krátkodobou toxicitu) látky.

Toxikologové mohou použít různé druhy zvířat, ale nejčastěji jsou testy prováděny na myších a krysách. Nejčastěji bývá vyjádřen jako množství chemikálie (většinou miligramy) podané na 100 gramů (u menších zvířat), nebo na kilogram (pro větší pokusné subjekty), tělesné váhy pokusného zvířete. LD50 lze určovat pro různé cesty vstupu, ale dermální (aplikováno na kůži), nebo orální (podáno ústně) způsoby podání jsou nejčastější.

LC („lethal concentration“) stanoví smrtící koncentraci. Hodnoty LC většinou popisují koncentraci látky ve vzduchu, ale ve studiích životního prostředí může popisovat i koncentrace látky ve vodě.

LC50 většinou udává koncentraci plynu ve vzduchu, který zabije 50% pokusných zvířat během dané doby (většinou hodin).

Ve vodním prostředí jsou typickými sledovanými organismy ryby, řasy a dafnie.

1.1.6 Limitní koncentrace

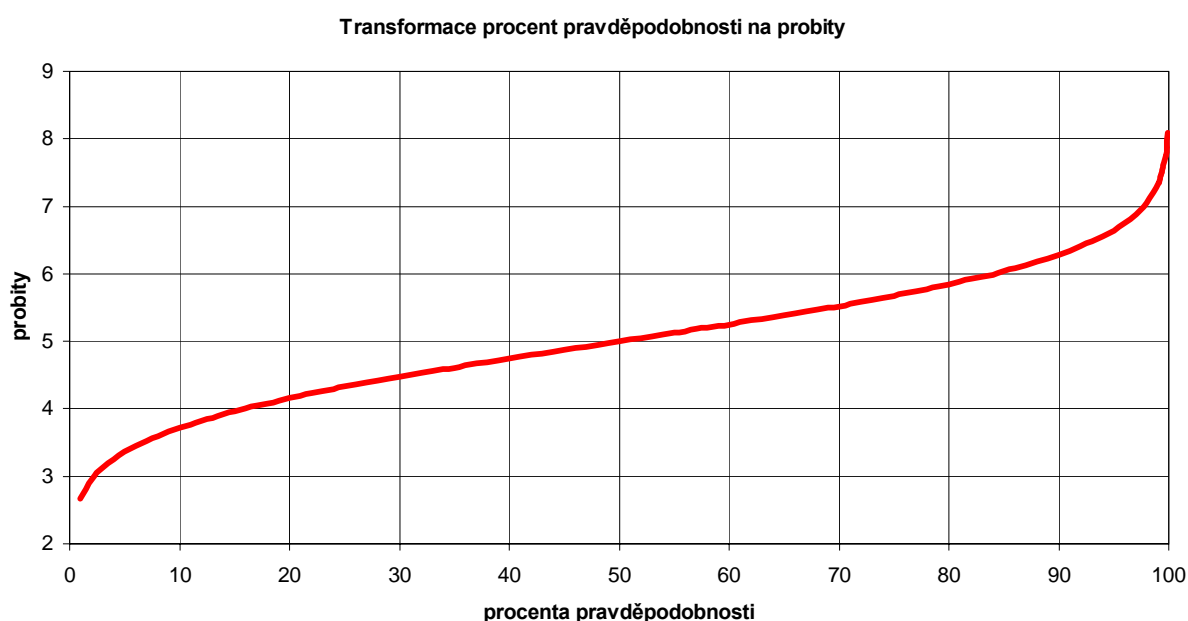
Limitní koncentrace [6.] je určitá koncentrace určená většinou vyhláškou, zákonem, nebo normou. Udává maximální přípustnou koncentraci látky ve vodě. Její hodnota se pro jednu látku výrazně liší podle využití kontaminované vody. Limitní koncentrace se určují pro různé látky například pro pitnou vodu, pro vodu určenou k úpravě na pitnou, nebo pro vodu ve vodních nádržích a tocích s ohledem na jejich funkci. Limitní koncentrací tedy budeme chápat limitní koncentraci látky v běžné řeči podle Nařízení vlády ČR 383/2000Sb.

1.1.7 Probit – Probitová funkce

Vyhodnocení následků znečištění není jednoduché, protože jsou závislé na mnoha špatně podchytitelných faktorech. Zvláště v námi sledovaném případě havárií, akutní zátěže, kde je koncentrace mocněna exponentem n (zpravidla $n > 1$). Tehdy je koncentrace silnější faktor, než doba expozice. Hůře proto můžeme určit reakci organismů na tuto zátěž i díky faktu, že toxicita jedné látky se může značně lišit pro různé živočichy. Proto reakce organismů vyhodnocujeme po výpočtu dávky pomocí probitových funkcí. V encyklopedii wikipedia.org [5.] se dočteme:

V teorii pravděpodobností a statistice je probitová funkce inverzní kumulativní distribuční funkcí, nebo kvantilovou funkcí spojovanou se standardní normální distribuční funkcí.

Pro standardní normální rozdělení (značeno $N(0,1)$) je kumulativní distribuční funkce značena $\Phi(z)$, což je spojitá, monotónní, rostoucí, esovitá funkce.



Obrázek 1. Transformace procent pravděpodobnosti na probity [1].

Probitová funkce provádí „inverzní“ výpočet, generující hodnotu náhodné proměnné $N(0,1)$, asociovanou se specifikovanou kumulativní pravděpodobností. [7.] Teorie probitových funkcí je naznačena například také v materiálech evropského projektu EU ACUTEX [1], který se zabývá vytvořením metodiky pro tvorbu evropských norem pro prahové hodnoty ohrožení pracujících s toxickými látkami v průmyslu (EU AETL).

V našem modelu používáme funkci kde probit je dán dvěma probitovými parametry, a a b . Vzorec těchto výpočtů viz. níže.

1.2 Definice prvků modelu

Tato kapitola naznačí uspořádání, strukturu modelu a vnitřní vazby.

1.2.1 Délka úseku

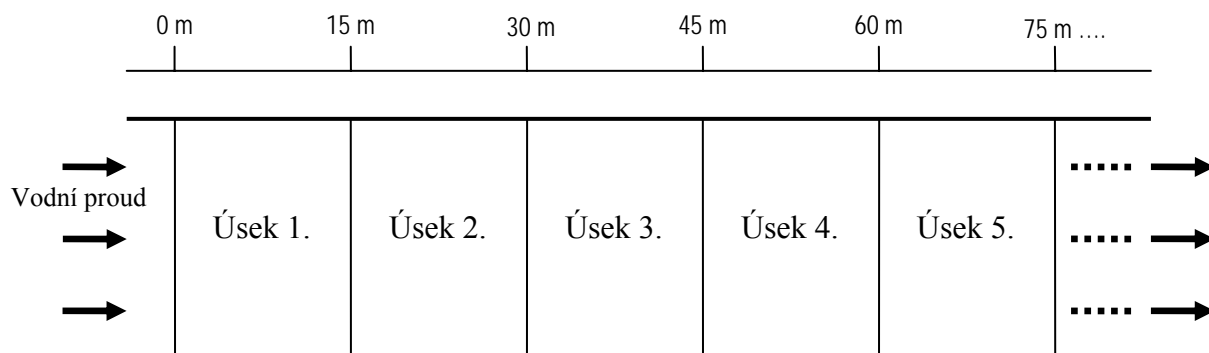
Jedním ze základních prvků modelu je elementární část toku, úsek, pro který počítáme jednotlivé sledované hodnoty. Úsek je část délky vodního toku. Jeho délku l , která je pro celý model konstantní, volíme podle několika skutečností.

Referenční rychlost proudu toku je jedním z parametrů, který bereme v úvahu při volbě délky úseku. Pro vyšší rychlosti volíme delší úseky, aby nedošlo k „přetečení úseku“ (viz. podkapitola Ředící poměr).

Dále délku úseku volíme podle průtoku ze stejného důvodu jako v odstavci výše, protože rychlost proudu v jednotlivých úsecích je závislá i na průtoku.

Délku úseku volíme tím menší, čím větší „rozlišení“ toku požadujeme.

Rozměr délky úseku jsou metry, a tato volená délka se pohybuje nejčastěji od 10 metrů po 50 metrů. Vstupní údaj „Počet úseků“ může být použit ke stanovení omezení výpočtů na určitý počet úseků.



Obrázek 2. Rozdělení vodního toku na úseky po 15 metrech.

1.2.2 Časový krok

Časový krok t_k je doba, po které probíhá přepočet koncentrace ve všech úsecích. Většinou tuto hodnotu volíme mezi 10 – 60 sekundami. Stejně jako délka úseku je časový krok volen podle průtoku a rychlosti toku. Také lze přihlížet i na již zvolenou délku úseku.

Tento vstupní údaj je pro celý model stejný. Pouze v případě, že při výpočtu dojde k přetečení úseku (viz. podkapitola Ředící poměr) se pro průtokovou třídu, kde se tento případ vyskytne, časový krok zmenší na polovinu.

Náš model můžeme omezit počtem časových kroků, které potom vyjadřují časové období, po které nás zajímá vývoj koncentračního pole v toku. Výpočet v tomto

případě má probíhat pro tolik úseků kolik je potřeba k úplnému rozplynutí látky do neškodné míry. Pokud se toto omezení nezvolí, je potřeba model omezit počtem úseků. Potom se pro zadaný počet úseků počítá koncentrace tolik časových kroků, kolik je potřeba k rozplynutí látky na neškodnou míru.

1.2.3 Průtok

Model počítá se třemi různými scénáři průtoků Q v korytě. Mělo by jít vybrat, který scénář nejlépe odpovídá reálné situaci.

Nejjednodušší případ, který můžeme simulovat, je konstantní průtok v celé délce sledovaného toku. V takovém případě je v každém úseku průtok roven průtoku dané průtokové třídy.

$$Q_{t,i} = Q_{t,1}$$

kde t je průtoková třída a i je číslo úseku.

Můžeme se také pokusit simulovat situaci, kdy se s každou určitou vzdáleností do řeky dostane nějaké další množství vody úměrné aktuálnímu průtoku v daném místě. K tomu je třeba určit kvocient průtoku k , který zvýší průtok v dalším úseku o jeho násobek. Tento kvocient se běžně může pohybovat okolo 1,0001 – 1,01.

$$Q_{t,i+1} = Q_{t,i} \cdot k$$

Třetí případ počítá s jednorázovými většími přítoky do sledovaného toku. Jedná se o větší či menší soutoky. V tomto případě je potřeba zadefinovat úseky odpovídající místům přítoků a jejich velikosti. V takových úsecích a v každém následujícím je průtok dán součtem dosavadního průtoku a deklarovaného přítoku.

1.2.4 Rychlost

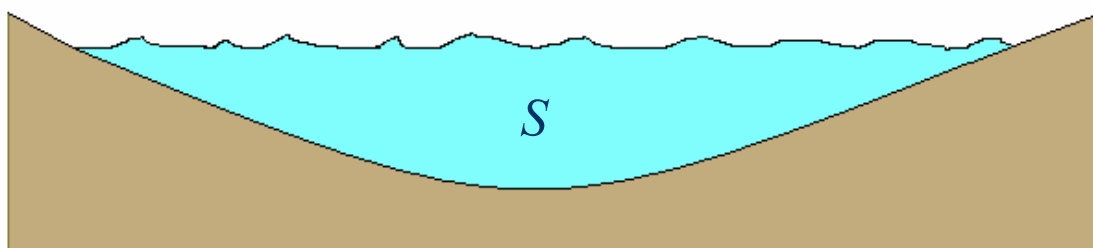
Předpokládáme, že rychlost proudění v se mění s průtokem, proto tuto rychlost vypočítáme pro každý úsek a všechny třídy průtoku pomocí referenčních hodnot rychlosti v_{ref} a průtoku Q_{ref} .

$$v_{t,i} = v_{ref} \cdot \sqrt{\frac{Q_{t,i}}{Q_{ref}}}$$

1.2.5 Efektivní průřez koryta

Koryto řeky není uzavřený prostor jako trubka. Proto se změna průtoku rozdělí podle spádu, reprezentovaného referenčním průtokem a rychlostí, mezi zvýšení/snížení rychlosti a zvětšením/zmenšením efektivního průřezu.

$$S_{t,i} = \frac{Q_{t,i}}{v_{t,i}} \cdot \sqrt{\frac{Q_{t,i}}{Q_{ref}}}$$



Obrázek 3. Efektivní průřez koryta – světle modrá plocha.

1.2.6 Objem vody úseku

Známe-li efektivní průřez koryta a délku úseku, můžeme spočítat objem vody V pro každý úsek. Používané jednotky objemu jsou m^3 .

$$V_{t,i} = S_{t,i} \cdot l$$

1.2.7 Nultý úsek

Nultý úsek označuje část toku před sledovanou oblastí. V podstatě se jedná o místo, kde cizí látka vtéká do řeky a tam se úplně smísí s vodou. Nultý úsek je ale jen pomocný prvek, který nezahrnujeme do našeho modelu. Pomocí něho vytváříme počáteční podmínky v modelu. Jeho délka je vždy menší než délka ostatních úseků, je ale přesně taková, aby celý jeho objem otekl za jeden časový krok. Počítáme ho pomocí tohoto výrazu,

$$V_{t,0} = Q_{t,0} \cdot t_k$$

kde $Q_{t,0}$ je průtok v nultém úseku. Uvažujeme, že je stejný jako v prvním úseku třídy t .

1.2.8 Ředící poměr a kontrola přetečení úseku

Ředící poměr je bezrozměrné číslo, které nám ukazuje, kolik vody z úseku odteče, resp. přiteče během jednoho časového kroku t_k . Pohybuje se v intervalu $(0,1)$ a jeho doplněk značí část vody, která v úseku zůstává.

$$r_{t,i} = \frac{V_{t,0}}{V_{t,i}}$$

Vstupními podmínkami (hlavně délkou úseku a časovým krokem) můžeme navodit takové podmínky, že v regulérním úseku se během časového kroku vymění

všechna, nebo více vody. Říkáme, že dochází k přetečení úseku. Tento stav je nežádoucí a proto je nutné provádět kontrolu, zda k němu nedochází.

Pro potřeby našeho modelu bylo určeno, že nevyhovující ředící poměr je každý větší než 0,8. Dostaneme-li někde takový ředící poměr provedeme pro danou průtokovou třídu zkrácení časového kroku na polovinu, přepočítáme objemy úseků a znovu spočteme ředící poměr. Tuto proceduru opakujeme tak dlouho, dokud nedostaneme přijatelný ředící poměr.

Protože objem nultého úseku je roven objemu, který za časový krok odeče, je ředící poměr v tomto úseku roven 1.

1.2.9 Koncentrační pole

Základním kamenem výstupů modelu jsou koncentrační pole. Počítáme pro každou průtokovou třídu jedno. Jedná se o dvourozměrný seznam koncentrací $c[mg/m^3]$ v jednotlivých úsecích ve všech časových krocích.

Nejprve je třeba spočítat okrajové hodnoty, a to koncentraci v nultém úseku. Ze vstupních hodnot známe hmotnost vylité látky M do řeky a dobu vtékání této látky Δt . Z toho spočítáme počet časových kroků n , po které se do modelu dostává kontaminovaná voda a dílčí hmotnost m , která vteče během jednoho časového kroku.

$$n = \frac{\Delta t}{t_k}$$

n je z množiny přirozených čísel.

$$m = \frac{M}{n}$$

potom se koncentrace v nultém úseku vypočítá takto:

$$c_{t,0,0\dots n-1} = \frac{m}{V_{t,0}}$$

Známe-li okrajové hodnoty koncentrací, můžeme přistoupit k výpočtu koncentračního pole pomocí vzorce:

$$c_{t,i,j} = r_{t,i} \cdot c_{t,i-1,j-1} + (1-r_{t,i}) \cdot c_{t,i,j-1}$$

Kde j je index časových kroků. První člen vzorce představuje vodu s jistou koncentrací, která do úseku přitéká. Druhý sčítanec je voda s jistou koncentrací, která v úseku zůstala z minulého časového kroku.

1.2.10 Dávka

Po vyřešení koncentračního pole lze z jeho hodnot spočítat dávku pro dané organismy. Každý organismus má specifikovanou jinou limitní koncentraci, kdy už je na cizí látku rezistentní. Proto, pokud se po celou sledovanou dobu v úseku neobjeví vyšší než limitní koncentrace, výpočet dávky v dalších úsecích můžeme přerušit, protože dále už nikde limitní koncentrace překročena nebude.

$$D_{t,i} = \sum_j c_{t,i,j}^n \cdot t_k$$

kde n je probitový parametr značící nebezpečnost látky

1.2.11 Probit

Pomocí probitových parametrů látky a dávky vypočítáme probit podle tohoto předpisu:

$$Y_{t,i} = a + b \cdot \ln D_{t,i}$$

kde a a b jsou probitové parametry cizí látky.

1.2.12 Pravděpodobnost úhynu v úsecích

Známe-li probit, přistoupíme k výpočtu pravděpodobnosti P úhynu v úsecích pomocí probitové funkce.

$$P_{t,i} = 0,5 \cdot (1 + \operatorname{erf}(Y_{t,i} - 5))$$

kde erf je tzv. Gaussova chybová funkce (Gauss error function) a je definována tímto vztahem:

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2 \cdot \pi}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} \cdot dt$$

1.2.13 Průměrná pravděpodobnost úhynu v úsecích

Konečným výstupem modelu je průměrná pravděpodobnost P_i . Jedná se o průměr pravděpodobností pro jednotlivé třídy v úsecích vážený ročním zastoupením dané třídy.

$$P_i = \sum_t P_{t,i} \cdot w_t$$

kde w_t je počet dní v roce, po které se v řece vyskytuje průtok zastoupený průtokovou třídou t .

1.3 Očekávané výsledky a výstupy

Hlavním úkolem vytvářené aplikace je výpočet průměrné pravděpodobnosti úhynu organismů v řece. Tomu předchází výpočet pravděpodobností pro jednotlivé průtokové třídy a výpočet expozičních dávek, které udávají přehled o situaci v období sníženého či zvýšeného průtoku. Vývoj a maximální hodnoty koncentrací v koncentračních polích mohou též poskytnout zajímavé informace.

1.3.1 Výstupy

Pro největší názornost by tyto výstupy měly být zobrazitelné graficky, a to koncentrace v grafu pro každý úsek a průtokovou třídu $c = f_j$ (časový krok), a pro každé koncentrační pole tabulka nejvyšších koncentrací. Dále grafy dávek a pravděpodobností pro každou průtokovou třídu a jejich tabulky hodnot, $D = f_i$ (úsek), resp. $P = f_i$ (úsek). Nakonec graf a tabulku průměrné pravděpodobnosti.

1.3.2 Předpokládané výsledky

Výpočet ředícího poměru by měl vycházet menší než 0,8. Zvláště při velkých rychlostech proudu a malých úsecích, či dlouhém časovém kroku může snadno dojít k přetečení úseku. Proto je nutné pro každé změně průtoku v toku tuto podmínku zajistit.

Koncentrace v jednom úseku by během sledované doby měla po přitečení kontaminované vody nejprve stoupat a po dosažení maxima (které by se mělo blížit koncentraci nultého úseku) klesat a postupně se rozplývat.

Dávka by měla více méně klesat exponenciálně.

Závislost pravděpodobnosti úhynu na koncentraci bude díky průběhu probitové funkce dosti strmá. Odpovídá to realitě, že i poměrně malá koncentrace toxické látky způsobí, že organismy v zasažené oblasti většinou nepřežijí. Teprve když se expoziční dávka začíná přibližovat k prahu citlivosti pravděpodobnost úhynu prudce klesá.

2 Program Kontaminace

V této kapitole popíšu provedení řešení mojí bakalářské práce a to počítačový program Kontaminace, který slouží pro modelování a provedení všech výpočtů, popsanych v předchozí kapitole.

2.1 Technická stránka aplikace

Seznámím s HW a SW požadavky a základním provedením a členěním programu.

2.1.1 HW a SW požadavky

Program byl vytvářen ve vývojovém prostředí Delphi™ 7.0 od společnosti Borland Software Corporation s rozšiřujícím balíkem SDL Suite Light Edition od firmy Software Development Lohninger. Jedná se o vývojové prostředí určené pro systém Microsoft Windows. Systém Windows je proto zásadní nutností pro spuštění aplikace, nejlépe jedná -li se o produkt Microsoft Windows XP (Home/Professional). K plnému využití funkcí programu je třeba textový editor, například NotePad (Poznámkový blok), který je běžnou součástí všech systémů Microsoft Windows.

Z hardwaru je ke spuštění aplikace nutný minimálně procesor MMX 200Mhz, operační paměť RAM 256MB, (doporučeno 512MB) , obyčejný grafický adaptér, a pro bezproblémový chod alespoň 200MB volného místa na disku, odkud je aplikace spouštěna.

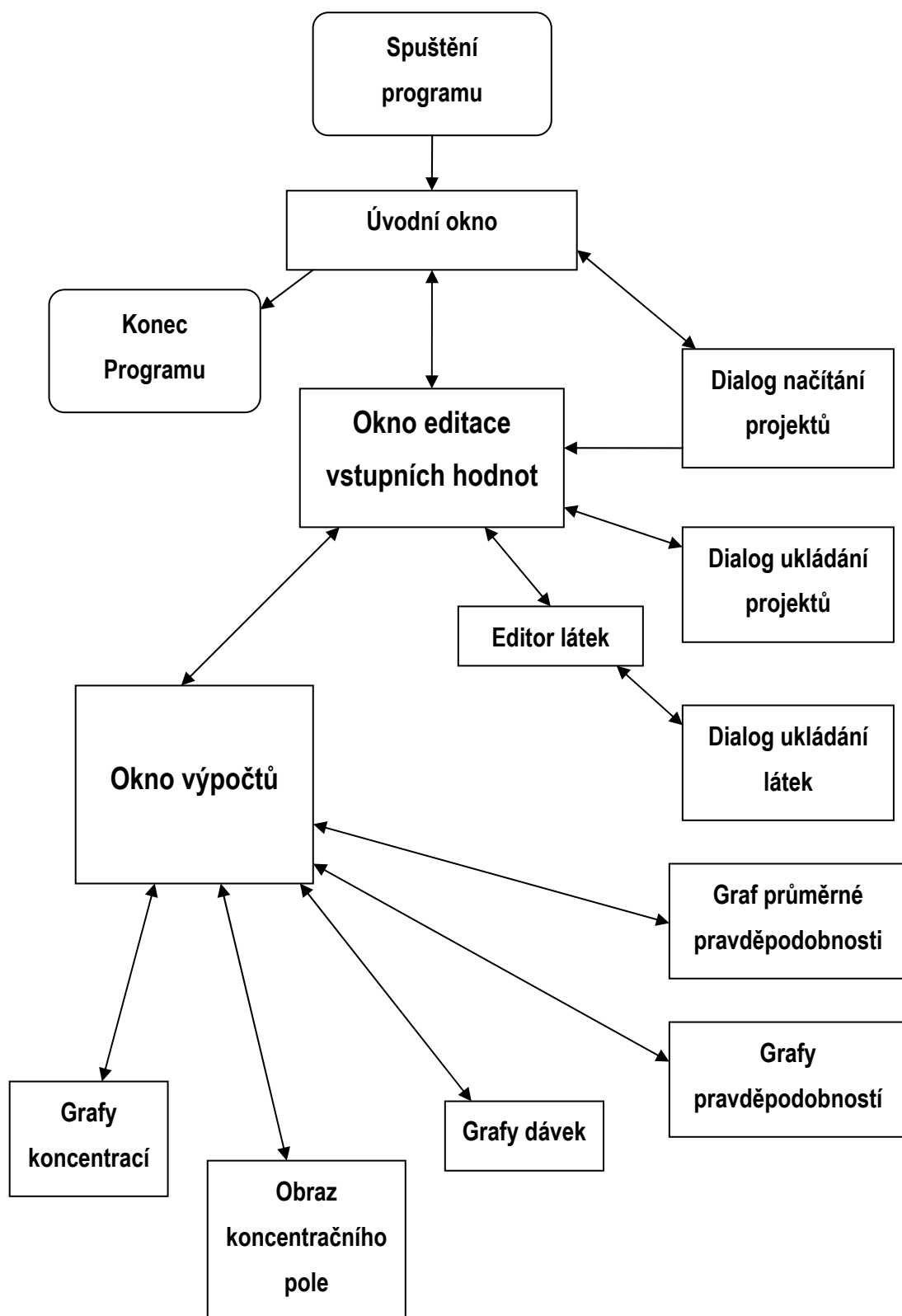
2.1.2 Základní rozčlenění programu.

Program lze rozdělit na část vstupní, procesní a výstupní.

Vstupní část zahrnuje úvodní okno s možností načtení uložených projektů, a vytvořením nových. Dále sem patří okno se záložkami, kde lze zadat všechny vstupní údaje potřebné pro výpočet a popis modelu. Můžeme sem zařadit i editor látek, kde můžeme nadefinovat údaje nových látek, potřebných pro výpočet, a další doplňující data.

Procesní část není reprezentována žádným vizuálním prvkem v programu, ale je řízena z okna výpočtů. Jedná se o všechny výpočetní procesy a algoritmy, které jsou aplikací vzorců z předchozí kapitoly.

Výstupní část obsahuje okno výpočtů, které má zastávat funkci organizátora výpočtových etap modelu. Po dokončení příslušných výpočtů lze získat přístup



Obrázek 4. Schéma uživatelského rozhraní programu Kontaminace.

k výsledkům buď ve formě výpisu hodnot, nebo ve formě grafické. Hodnoty jsou ukládány do textových souborů, které lze pomocí textového editoru prohlížet. Hlavní výstupní informace lze zobrazit graficky. Jedná se o grafy koncentrací, grafy dávek a grafy pravděpodobností. Navíc lze zobrazit obrázek koncentračního pole.

2.2 Dokumentace k aplikaci Kontaminace (Manuál)

Podrobně popíšu všechny funkce a ovládání aplikace. Předpokládám, že čtenář zná základní funkce a ovládání okenních aplikací systému Microsoft Windows. Veškeré pomocné obrázky oken jsou pořízeny v systému Microsoft Windows XP Professional a v detailech se mohou lišit od nastavení systému na jiných stanicích a jiných verzí systému Windows.

2.2.1 Instalace a spuštění aplikace

Program není třeba nijak složitě instalovat. Stačí zkopírovat jeho adresář s celým obsahem na místo, kde máme možnost a práva měnit obsah adresářů, vytvářet a mazat soubory.

V adresáři programu potom vyhledáme soubor kontam.exe a spustíme ho.



Obrázek 5. Úvodní okno aplikace Kontaminace.

2.2.2 Úvodní okno

Úvodní okno je začátek a konec aplikace. Krom tématického obrázku zde najdeme 3 ovládací tlačítka. Pro vytvoření nového modelu ťukneme na první z nich s nápisem Nový model, čímž se otevře okno editace vstupních údajů s vyplněnými výchozími hodnotami.

Můžeme ťuknout na tlačítko Načíst model. Otevře se dialog pro načtení souboru. Vybereme soubor s uloženým modelem a stiskneme OK. Otevře se okno editace vstupních parametrů s vyplněnými formuláři podle načteného souboru. Soubory uložených modelů mají příponu „mel”.

V tomto okně lze také ukončit celou aplikaci. Kdykoliv chceme ukončit celý program, pozavíráme všechna okna a ťukneme buď na tlačítko Konec, nebo standardně na tlačítko Zavřít nahoře vpravo na liště okna.

2.2.3 Okno Editace vstupních hodnot

Okno Editace vstupních hodnot slouží pro veškeré zadávání vstupních údajů. Je rozčleněno do čtyř sekcí pomocí záložek (karet). Obsah karet vždy odpovídá charakteru zadávaných parametrů.

Pro všechny karty platí, že pokud je požadováno v některém formuláři desetinné číslo, je nutné ho zadat s desetinnou tečkou, nikoliv s čárkou, jinak je zobrazována zpráva o chybně zadané hodnotě, dokud není chyba opravena.

Ve spodní části se nachází ovládací tlačítka: Tlačítko Zavřít zavře okno a zaktivní okno úvodní (stejnou funkci plní i klasické tlačítko Zavřít nahoře vpravo na liště okna). Pokud práci neuložíme, bude po zavření tohoto okna ztracena.

Tlačítko Uložit vyvolá dialog pro uložení vstupních údajů modelu na disk. Soubory s takto uloženým projektem mají koncovku „mel”.

Pokud jsme zadali všechny potřebné údaje, ťukneme na tlačítko modelovat, které nás uvede do okna výpočtů. Program načte všechny hodnoty z formulářů a uloží je do textového souboru Vstup.txt do adresáře aplikace.

2.2.4 Karta Model

První karta tohoto okna má především informační funkci. Vyplňujeme zde jméno celého modelu (projektu) a můžeme přidat podrobnější popis pokud, chceme připojit některé poznámky ke konkrétnímu modelu.

Poznámky jsou ukládány jako samostatný textový dokument (txt). Má stejný název jako název souboru modelu, ukládá se do stejného adresáře jako model, liší se pouze v obsahu a příponě. Tento soubor lze pomocí jakéhokoliv textového editoru upravovat i mimo program Kontaminace. Je ale nutné ponechat tomuto souboru jeho jméno a uchovat ho ve stejném adresáři jako příslušný soubor mel.

Obrázek 6. Okno Editace vstupních hodnot – karta Model.

2.2.5 Karta Vodní tok

Zde jsou umístěné všechny formuláře pro údaje týkající se charakteru vodního toku. Krom názvu toku jsou všechny další formuláře na kartě povinné, a je nutné je vyplnit.

Formulář referenčního průtoku a referenční rychlosti vyžaduje reálné číslo. Zvláštní pozornost je třeba věnovat tabulce distribuce průtoků. Zde musí být vyplněna alespoň jedna průtoková třída a každá třída musí mít vyplněný celočíselný údaj

„Četnost zastoupení [dny/rok]“ udávající počet dnů v roce, a průtok této třídy (reálné číslo). Definice třídy může zůstat nevyplněná. Počet tříd měníme pomocí interaktivního políčka „Počet tříd:“. Při změně hodnoty v tomto poli se mění počet dostupných řádků v tabulce distribuce průtoků. Je třeba mít na paměti, že počet zadaných tříd významně ovlivňuje hardwarové požadavky programu a rychlost výpočtů. Maximální počet průtokových tříd je 21, což by mělo být pro většinu případů dostačující.

Tlačítko „Sesypat Tabulku“ slouží k přesunu zaznamenaných údajů na prázdné řádky, které mohou vzniknout při mazání tříd na dřívějších řádcích.

Kontaminace - model

Editace vstupních hodnot:

Model | **Vodní tok** | Cizí látka | Výpočet

Název toku: Kanál Referenční průtok [Qr]: 0.5 m3/s Referenční rychlost [vr]: 0.2 m/s

Distribuce průtoků

Počet tříd: 4 Sesypat Tabulku

Definice třídy	Četnost zastoupení [dny/rok]	Průtok [m3/s]
Průtok v létě	80	0.25
Průtok na podzim	130	0.55
Průtok při jarním tání	50	0.7
Průtok na jaře	20	0.9

Zavřít Uložit Modelovat

Obrázek 7. Editace vstupních hodnot – Karta Vodní tok.

2.2.6 Karta Cizí Látka

Na tomto formuláři se zadávají údaje spojené s látkou vniklou do toku. Všechny formuláře na této kartě je nutno vyplnit. Pokud vytváříme nový model, je nutné vybrat látku v rozbalovacím formuláři typu combobox „Cizí látka“. Její parametry se zobrazí

na panelu níže. Dále zadáváme množství látky v kilogramech a dobu přitékání v minutách (oba údaje jsou reálná čísla). V teoretické části (kapitola 1.2.9) je deklarováno, že n (počet časových kroků po které vtéká cizí látka) musí být přirozené číslo. To by znamenalo, že je nutné volit takovou dobu přitékání látky, aby byla (v sekundách) beze zbytku dělitelná časovým krokem. Algoritmus výpočtu počátečních podmínek je však navržen tak, že tato podmínka nemusí být splněna. Poslední časový krok přítoku látky přiteče „zbytek“ z toho, co přitékalo v předchozích krocích.

Kontaminace - model

Editace vstupních hodnot:

Model | Vodní tok | **Cizí látka** | Výpočet

Cizí Látka: čpavek Smazat vybranou Editovat vybranou Vytvořit novou

čpavek NH3

Součinn rozpustnosti pKs:
Rozpustnost při 0°C [g látky/100g vody]:
Rozpustnost při 20°C [g látky/100g vody]:
Hustota látky [kg/m3]:
Kinematická viskozita [(v*m2)/(10(exp6)*s):]
Povrchové napětí (Sigma) [N/(10(exp3)*m):]
Teplota tání [°C]:
Teplota varu [°C]:
Měrná tepelná kapacita při 20°C [J/(kg*K):]

Živočich/Organismus	Limitní koncentrace	LC50	LD50 [mg/kg]
Ryba	1	1	1

Probitové parametry:

a	-14.3
b	1
n	2

Množství láky [M] : 200 kg Doba přitékání [Δt] : 10 min

Zavřít Uložit Modelovat

Obrázek 8. Editace vstupních hodnot – karta Cizí látka.

Tato karta také obsahuje přístup k editoru látek. Tlačítko „Vytvořit novou“ otevře prázdné okno editoru látek, tlačítko „Editovat vybranou“ otevře editor látek s načtenými parametry vybrané látky v comboboxu. Tlačítko „Smazat vybranou“ je blokováno, protože jeho zamýšlená funkce není zatím implementována.

2.2.7 Editor Látek

Okno editoru látek slouží k vytváření cizích látek a úpravě stávajících. Pro snadnější přenosnost jednotlivých látek mezi různými počítači je každá látka uložena ve svém souboru v adresáři „/Substances“. Přípona těchto souborů je sns. Při otevření okna editace vstupních hodnot se obsah tohoto adresáře načte, a přes výše zmíněné rolovací menu se zpřístupní uložené látky.

V editoru červeně označené formuláře a tabulky jsou povinné údaje, bez kterých látku nelze použít pro model a nelze ji proto uložit. V tabulce toxikologické parametry je třeba vyplnit údaje alespoň pro jeden organismus. Kromě sloupce „Organismus/Živočich“ se jedná o reálná čísla. Do tabulky probitové parametry se k parametru „a“ a „b“ vyplňují reálná čísla a parametr „n“ musí být přirozené číslo.

Editor Látek

Editace parametrů látek

Název látky: Chemický vzorec:

Obrázek:

Fyzikální parametry:

Parametr	Hodnota
Součin rozpustnosti pKs [-]	
Rozpustnost při 0°C [g látky/100g vody]	
Rozpustnost při 20°C [g látky/100g vody]	
Hustota látky [kg/m ³]	
Kinematická viskozita [(v*m ²)/(10(exp6)*s)]	
Povrchové napětí [Sigma] [N/(10(exp3)*m)]	
Teplota tání [°C]	
Teplota varu [°C]	
Měrná tepelná kapacita při 20°C [J/(kg*K)]	

Obrázek není zadán

Toxikologické parametry:

Živočich/Organismus	Limitní koncentrace [mg/kg]	LC50	LD50 [mg/kg]

Probitové parametry:

Parametr	Hodnota
a	
b	
n	

Obrázek 9. Okno editoru látek.

K dané látce lze připojit i demonstrační obrázek ve formátu gif, bmp, nebo jpg. Přiřazením obrázku k látce dojde ke zkopírování daného obrázku do vlastního adresáře aplikace „/Images“. Tlačítkem s křížkem lze obrázek od látky odpojit. Ostatní údaje

jsou nepovinné a krom informativní funkce nemají zatím další smysl. Tlačítkem „Uložit“ vyvoláme ukládací dialog a látku můžeme uložit jako soubor s příponou sns. Pro použití v látce v aplikaci je nutné ji uložit do adresáře „/Substances“ umístěném ve složce programu.

2.2.8 Karta Výpočet

Zde zadáváme údaje týkající se výpočtu modelu a jeho organizace.

Je nutné zadat délku úseku v metrech a délku časového kroku v sekundách (reálná čísla). Tyto údaje je třeba volit tak, aby pokud možno nedocházelo k přetečení úseku.

Kontaminace - model

Editace vstupních hodnot:

Model | Vodní tok | Cizí látka | **Výpočet**

Délka úseku: m

Časový krok: s

Omezení

☐ Omezení počtem úseků úseků

☒ Omezení časem časových kroků

Zvyšování průtoku

☒ Žádné

☐ Postupné (kvocient)

☐ Jednorázové Počet přítoků:

Definice přítoku	Úsek	přítok [m3/s]
	4	1

☐ Provést automaticky všechny výpočty

Pro zobrazení dvou křivek v grafu je nutné počítat s tím, že omezení časem musí být menší než 500 pro graf koncentrací. Pro ostatní grafy musí být takto omezen počet úseků.

Obrázek 10. Editace vstupních hodnot – karta Výpočty.

Dále je nutné zadat nějaké omezující podmínky. Vybíráme, zda model omezíme počtem úseků nebo počtem časových kroků. Zvolením jedné z možností se ta druhá při výpočtu nastaví na maximální hodnotu, což je 1000. Např. omezíme-li model na 300

úseků, budou výpočty probíhat po 1000 časových kroků. Nastavením těchto parametrů lze znatelně měnit rychlost výpočtu. Dále je nutné brát v úvahu vlastnost neplacené verze balíku SDL Suite, která se podle zvoleného omezení neblaze projevuje ve výsledných grafech. (viz podkapitola 2.2.10 a 2.2.11).

Můžeme zvolit způsob zvyšování průtoku. Volba „Žádné“ zajistí konstantní průtok, volba „Postupné (kvocient)“ zajistí, že do každého úseku přiteče zadaný násobek (kvocient) průtoku předchozího úseku. Kvocient je nutné volit opatrně, aby v konečných fázích průtok nedosahoval nesmyslných hodnot a nezpůsobilo to přetečení některých proměnných (kontrola přetečení proměnných zatím není implementována). Třetí možnost je zvyšovat průtok jednorázově. K zadání přítoků slouží tabulka. Do prvního sloupce můžeme napsat název přítoku, dále musíme zadat číslo úseku (přirozené číslo), do kterého přítok vtéká, a velikost přítoku v m^3/s (reálné číslo). Maximální počet přítoků je 256.

Funkce „Provést automaticky všechny výpočty“ zatím není implementována.

2.2.9 Okno výpočtů

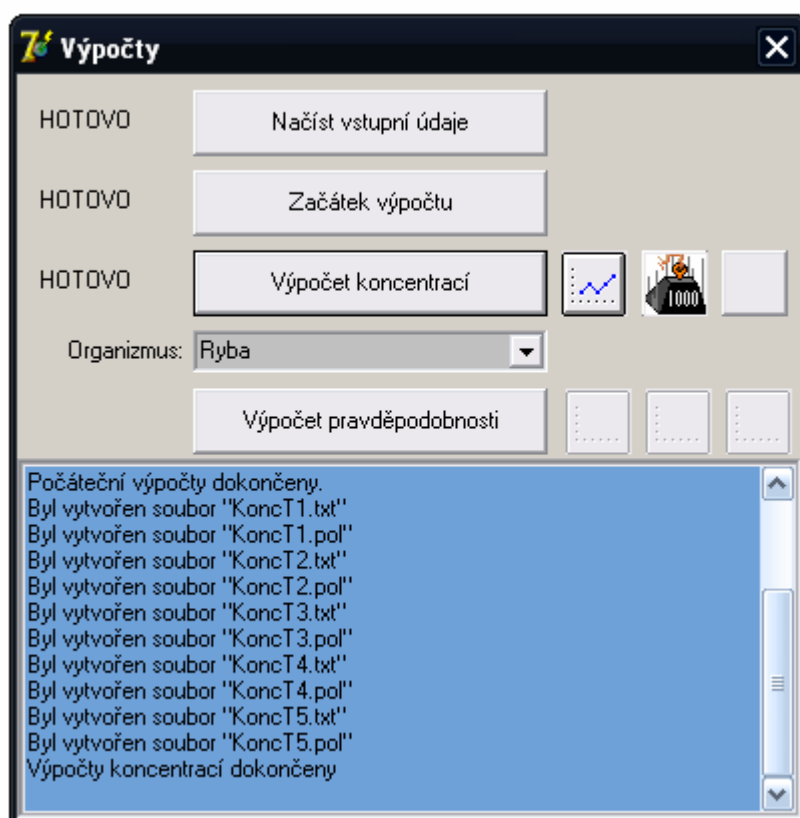
Odtud jsou řízeny všechny výpočty a přístup ke grafům. Při otevření tohoto okna dojde k načtení vstupních údajů ze souboru Vstup.txt. Soubor lze načíst i kdykoliv poté pomocí tlačítka „Načíst vstupní údaje“. Tím se ale zneplatní všechny doposud provedené výpočty a je nutné je provést znovu.

Kliknutím na tlačítko „Začátek výpočtu“ proběhne výpočet průtoků, rychlostí, průřezů, objemů a ředících poměrů pro všechny průtokové třídy a úseky. Také budou vytvořeny/přepsány soubory s výsledky těchto výpočtů. Případná změna časového kroku je oznámena pomocí informačního panelu ve spodní části okna. Po dokončení se vedle tlačítka objeví nápis HOTOVO.

Dále můžeme pokračovat výpočtem koncentračních polí. Tento výpočet díky počtu iterací programu trvá nejdéle. Jeho výstupem jsou textové soubory KoncT.txt číslované podle tříd. Dále jsou z důvodu ušetření paměti tato koncentrační pole v podobě surových dat ukládána do stejnojmenných souborů s příponou pol. Mívají okolo 8MB na jednu třídu. Textové soubory vzhledem ke svému rozsahu nejsou moc přehledné. Řádky mají reprezentovat úseky a sloupce časové kroky, ale z toho důvodu, že v textovém souboru může být na jednom řádku maximálně 1024 znaků toto uspořádání úplně neodpovídá. Limit 1024 znaků se při tak velkém koncentračním poli překročí velmi snadno, takže jeden úsek se rozděluje na více řádků. Pro alespoň

částečné ulehčení orientace v tomto souboru jsou „řádky“ úseků od sebe odděleny sekvencí znaků „***“. Po dokončení výpočtů koncentrací se zaktivní tlačítko dalšího výpočtu, menu organismů, kde vybíráme druh, pro který budeme počítat dávky a pravděpodobnost úhynu. Dále se zaktivní tlačítka pro graf koncentrací, tlačítko pro kontrolu celkové hmotnosti v toku (vytvoří txt soubory s bilancí hmotnosti v časových krocích) a pak také pro informativní okno s vykresleným koncentračním polem, které je vytvořeno zatím pouze pro první průtokovou třídu a slouží jen pro velmi hrubou představu o vývoji koncentrace v toku.

Po ťuknutí na tlačítko „výpočet pravděpodobností“ proběhnou výpočty dávek, probitu a pravděpodobností, včetně průměrné pravděpodobnosti pro organismus vybraný v předešlém formuláři. Vytvoří se příslušné textové soubory s výsledky a zpřístupní se tlačítka pro grafy dávek, pravděpodobnosti úhynu pro jednotlivé průtokové třídy a pro průměrnou pravděpodobnost úhynu v úsecích.



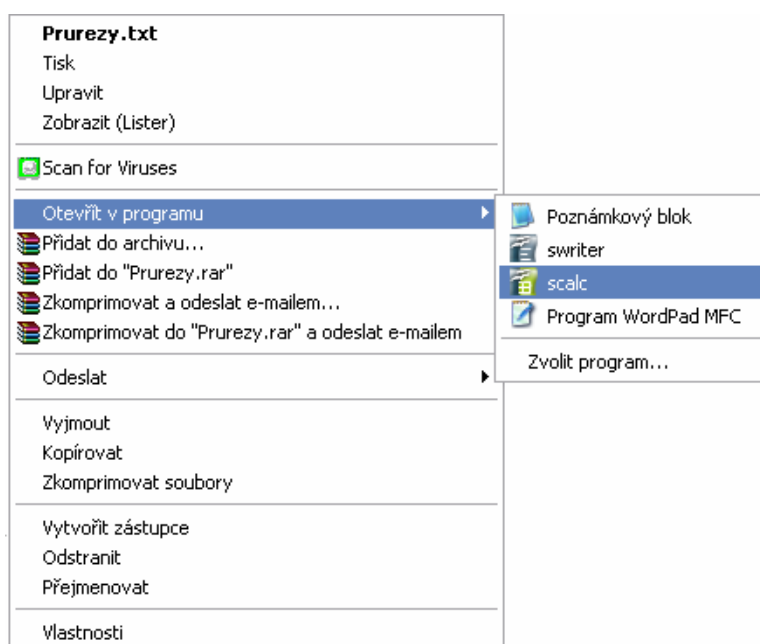
Obrázek 11. Okno výpočtů.

U tlačítek je aktivována funkce tzv. Hint, což je plovoucí nápověda, která se zobrazuje po najetí myši na tlačítko. Tam se lze dočíst, k čemu které tlačítko slouží.

Program Kontaminace nemá zabudovanou funkci mazání svých souborů.

Vzhledem k tomu, že některé mohou být poměrně velké, je nutné tyto soubory smazat po ukončení aplikace ručně. Jedná se hlavně o soubory s příponou pol.

Textové soubory, kromě souborů koncentrací, lze poměrně snadno exportovat do tabulky tabulkového procesoru, podle jeho typu. Například způsobem ukázaným na obrázku 12. do tabulkového procesoru Open Office 2 Calc. Export je třeba nastavit tak, aby oddělovač buněk byl brán jako tabulátor, při případném výskytu více tabulátorů za sebou tyto oddělovače sloučit do jednoho. Je také nutné v tabulkovém procesoru uživatele nastavit desetinný oddělovač na tečku.

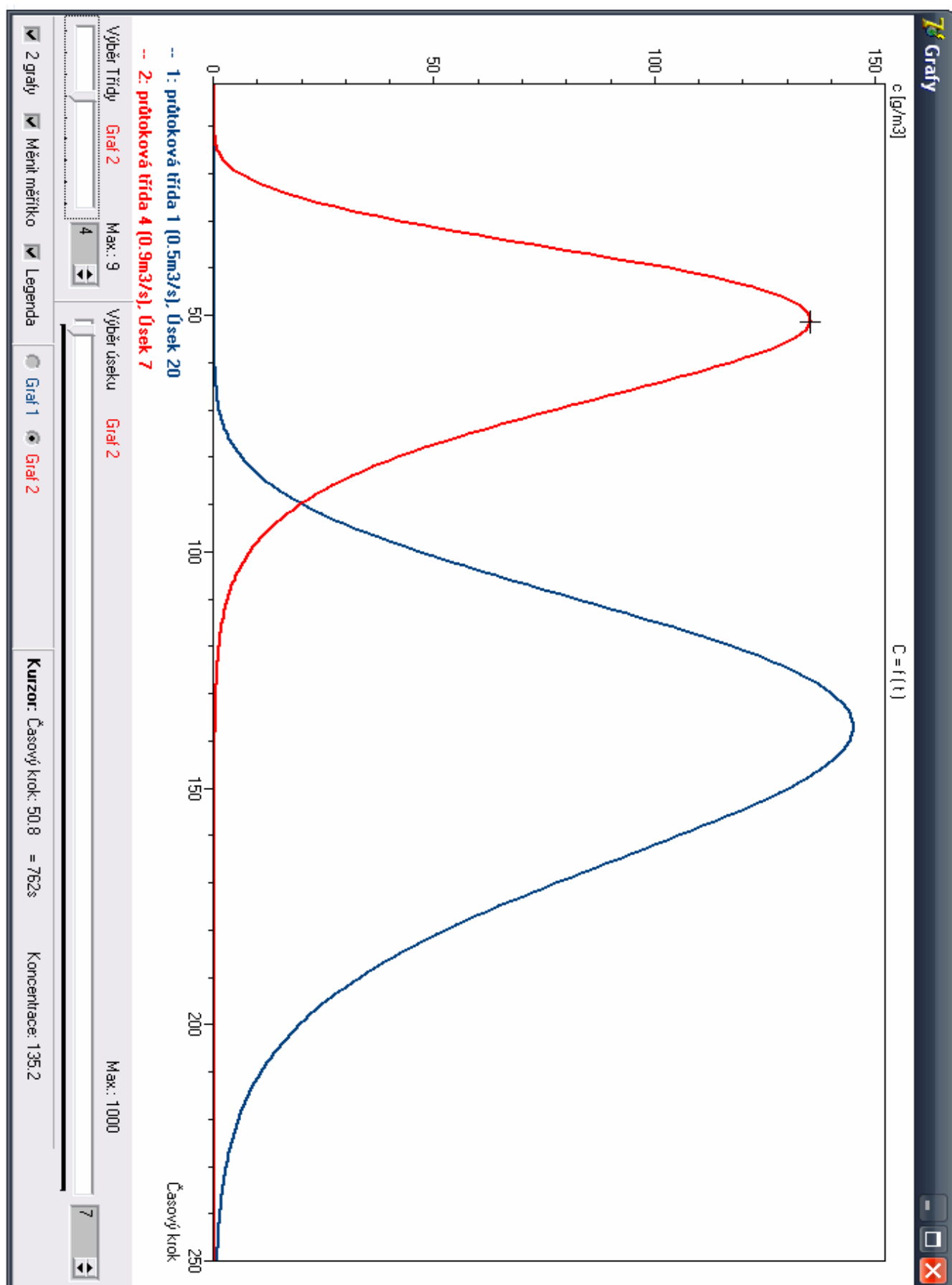


Obrázek 12. Export tabulek v souboru txt do tabulkového procesoru OO2 Calc

2.2.10 Okno grafů

Okno grafů je konstrukčně pouze jedno pro všechny grafy. Jeho vlastnosti se mění podle toho, který graf je v okně zobrazován. Velikost okna lze běžným způsobem měnit, takže grafy lze například i maximalizovat na celou obrazovku. V dolní části okna se nachází ovládací panel, odkud mimo jiné nastavujeme zobrazovaný graf. Hlavním ovládacím prvkem jsou posuvníky. Ten menší, levý, slouží k nastavení průtokové třídy, ten větší, pravý, slouží k nastavení úseku v grafu koncentrace. S oběma těmito posuvníky jsou propojeny interaktivní editační pole, umístěné vedle nich.

Dále zde lze pomocí zaškrtačacího políčka „2 grafy“ přidat do grafu druhou (červenou) křivku, pokud to umožňuje omezení SDL Suite. Po zaškrtnutí tohoto políčka se zaktivní i vedlejší panel s výběrovými tlačítky s barevnými nápisy podle grafů. Ovládání posuvníků je přiřazeno vždy právě zde zvolenému grafu.



Obrázek 13. Okno grafů (koncentrací)

Druhé zaškrtnutí „Měnit měřítko“ ovlivňuje škálování osy y v grafu. Pokud není zaškrtnuté, maximální hodnota na ose y se při změně grafu nemění. Pouze v případě, že chceme zobrazit graf s většími funkčními hodnotami, měřítko se zvětší právě na tuto větší hodnotu a takové zůstává až do té doby, dokud se v grafu zase neobjeví vyšší hodnota. Je-li zaškrtnuté, měřítko osy y se při každé změně grafu optimalizuje tak, aby byl prostor grafu dobře využit.

Třetí zaškrtnutí, pokud je zaškrtnuté, zobrazuje legendu. Údaje v legendě jsou barevně odlišeny, takže musí být jasné, který údaj patří ke které křivce.

Úplně vpravo je panel souřadnic. Pohybem v grafu tento panel ukazuje aktuální pozici kurzoru.

Graf koncentrací je závislostí koncentrace v jednom úseku na čase. Ukazuje vývoj koncentrace v úseku vybraném pravým posuvníkem. Souřadnice časového kroku na panelu souřadnic jsou také přepočítávány na sekundy. Při změně třídy dochází k načítání příslušného souboru pol. Proto se zobrazí tlačítko „Překreslit – Načíst“, aby se příliš hbitými změnami třídy nepřetížil systém.

Graf dávek a pravděpodobnosti mají deaktivovaný pravý posuvník, protože zde měníme pouze třídu. V tomto případě se při změně třídy nenačítají soubory z disku, proto se výše zmíněné tlačítko nezobrazuje.

Graf průměrných pravděpodobností má zablokované oba jezdce, protože se jedná o průměr pravděpodobností v průtokových třídách.

Graf lze načíst do paměti (nejlépe maximalizovaný) jako obrázek bmp pomocí klávesy „Print Screen“ a uložit do souboru pomocí vhodného grafického editoru, například Paint (Malování).

2.2.11 Omezení balíku SDL Suite

Balík komponent a funkcí je placený produkt. Většina jeho funkcí je ve více méně omezené funkčnosti přístupná i zdarma v tzv. Light verzi. Z tohoto balíku využívám funkci erf pro výpočet pravděpodobnosti. Tato funkce nijak omezena není.

Dále využívám komponentu RChart pro snadné vykreslování grafu. Tato komponenta je omezena poměrně hodně. Zřejmě se jedná o komponentu, na kterou jsou její autoři patřičně pyšní. Její hlavní omezení tkví v tom, že do jednoho takového grafu lze vynést maximálně 1000 bodů. Z toho (kromě jiného) plyne i maximální rozsah omezení modelu. Dále pak lze vykreslit pouze dvě křivky do jedné komponenty RChart.

S těmito omezeními musíme počítat při omezování modelu. Problémem je, že grafy koncentrací mají na osu x vynášené časové kroky a ostatní grafy úseky. Z toho vyplývá, že pro zobrazení dvou grafů koncentrací je třeba model omezit počtem časových kroků, a to maximálně na 500 časových kroků. U ostatních grafů je pro tuto funkci nutné omezit počet úseků maximálně na 500.

Zaškrtávatko „2 grafy“ je neaktivní, pokud se pohybujeme v grafu, kde nelze druhý graf zobrazit.

Vlivem omezení dále není možné přímo pomocí kódu programu uložit graf do souboru, tudíž tato možnost nemohla být implementována. Lze ho ale uložit jako bitmapu, viz. podkapitola 2.2.10.

3 Praktická aplikace programu Kontaminace

Funkčnost programu Kontaminace byla ověřena na úloze vyhodnocení dopadů úniku čpavku do řeky Ploučnice v obci Noviny pod Ralskem.

3.1 Zadání

Malá obec Noviny pod Ralskem se nachází poblíž městečka Mimoň v severních Čechách. V jejím blízkém okolí je významné ložisko uranu, které bylo v minulosti dobýváno chemickým loužením (a těžba doposud dobíhá), ke kterému se krom jiného používá vysoce toxický čpavek NH_3 . Simulujme únik vodného roztoku amoniaku do řeky Ploučnice v této lokalitě.

3.1.1 Čpavek

Čpavek [**Chyba! Nenalezen zdroj odkazů.**] je roztok vody a amoniaku zásadité povahy. Nazývá se hydroxid amonný, ačkoliv se chemicky o hydroxid nejedná. Amoniak se vyskytuje v přírodě díky mikrobiálnímu rozkladu organických zbytků zpravidla vázaný ve formě amonných solí. Průmyslově se amoniak vyrábí katalytickým slučováním dusíku a vodíku (jako katalyzátor se používá houbové železo) za vysokého tlaku (20 až 100 MPa) a vysoké teploty (nad 500 °C). [**Chyba! Nenalezen zdroj odkazů.**]Ve vodě se amoniak nachází v neškodné iontové formě (NH_4^+) a ve formě molekulární (NH_3), která je toxická pro vše živé. Podíl jednotlivých forem amoniaku ve vodném roztoku je závislý na pH a teplotě vody. Se stoupající teplotou a hodnotou pH přecházejí neškodné amonné ionty na toxický amoniak.

3.1.2 Vstupní hodnoty

Zadejme do našeho programu tyto vstupní hodnoty:

Jméno Projektu:	Ploučnice - Noviny
Název Toků:	Ploučnice
Referenční rychlost v_r :	0.2 m/s
Referenční průtok Q_r :	0.5 m ³ /s
Počet tříd průtoků:	9

Definice třídy	Četnost zastoupení [dny/rok]	Průtok [m ³ /s]
< 500	29	0.5
500 - 600	42	0.55
600 - 800	114	0.7
800 - 1000	55	0.9
1000 - 1200	55	1.1
1200 - 1500	32	1.35
1500 - 2000	14	1.75
2000 - 3000	8	2.5
< 3000	16	4.5

Obrázek 14. Tabulka průtokových tříd.

Název látky: čpavek

Chemický vzorec: NH₃

Organismus: Ryba

Limitní Koncentrace: 200 mg/m³

Probitový parametr a: -14.3

Probitový parametr b: 1

Probitový parametr n: 2

Množství látky: 6 kg

Doba přitékání: 1 min

Délka úseku: 20 m

Časový krok: 15 s

Výběr omezení: Počtem úseků*

Omezení počtem úseků: 110

Výběr zvyšování průtoku: postupné (kvocient)

Kvocient zvyšování průtoku: 1.003

Model s takto zadanými hodnotami je uložen na CD.

* Pro možnost využití v grafu koncentrací 2 křivek vytvořím ještě jeden stejný model, jen omezený počtem časových kroků.

3.1.3 Výpočty

Po zadání vstupních hodnot a stisku tlačítka modelovat přistoupíme k výpočtu modelu. Vstupní hodnoty jsou automaticky načteny, takže tiskneme tlačítko začátek

výpočtu. Výsledky těchto výpočtů můžeme zkontrolovat v textových souborech (*Prutoky.txt*, *Rychlosti.txt*, *Průřezy.txt*, *Objemy.txt*, *RediciPomery.txt*).

Pokračujeme výpočty koncentračních polí. Po dokončení výpočtů získáme přístup k textovým souborům s výsledky, grafům koncentrací a obrazu koncentračního pole 1. průtokové třídy.

V rozbalovacím menu níže zvolíme živočicha „Ryba“ a stiskneme tlačítko výpočet pravděpodobností. Vytvoří se exportovatelné soubory txt (*Davky.txt*, *Probity.txt*, *Pravdepodobnosti.txt*, *CelkPrb.txt*). Tím jsou všechny výpočty dokončené.

3.1.4 Výstupy

Z první fáze výpočtů ukazují část tabulky objemů (tabulka 1.), které se úsek od úseku zvětšují kvůli volbě postupného zvyšování průtoku. Takový nárůst hodnot lze ovšem sledovat i v ostatních tabulkách počátečních výpočtů, krom tabulky ředícího poměru.

Z dalšího kroku předvádím některé grafy koncentrací v úsecích (obrázky 15. až 18.). Grafy na obrázcích 15. a 16. ukazují rozdíl koncentrací ve stejné části toku díky různému průtoku. Obrázek 15. navíc ukazuje strmý nárůst koncentrace po dobu přitékání látky. V grafech na obrázcích 17. a 18. je vidět změna koncentrace v jedné průtokové třídě díky postupnému rozplývání látky po délce toku.

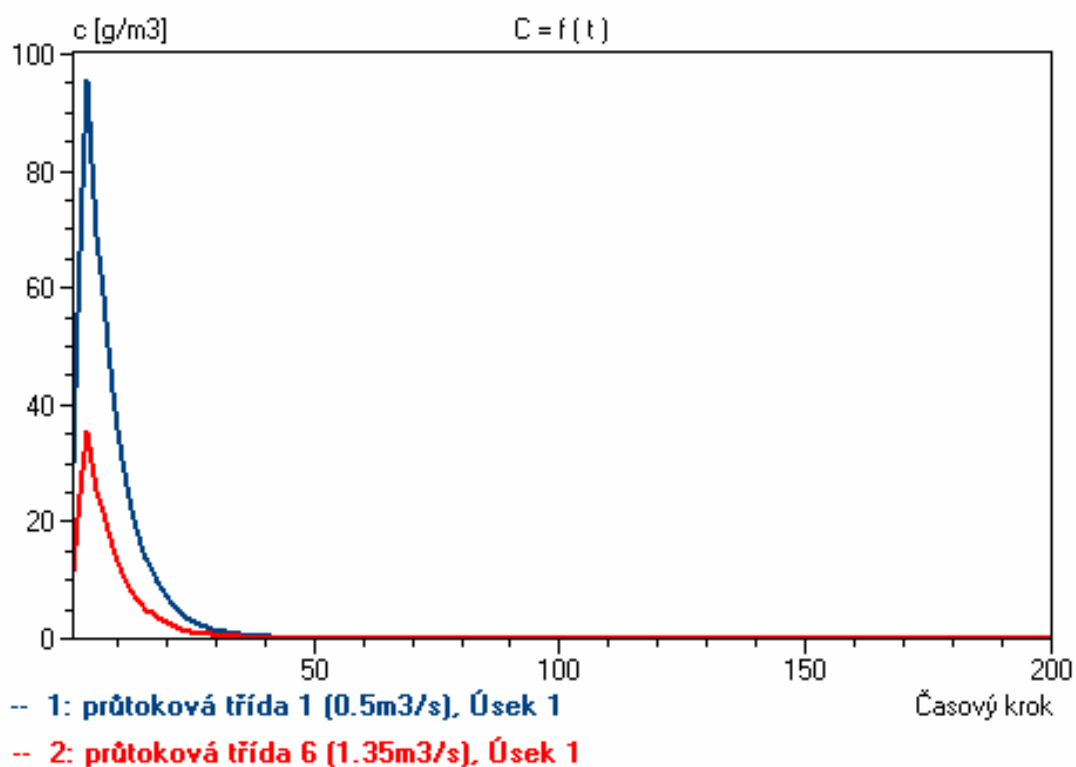
Dále předkládám graf dávek (obrázek 19.). Křivky jsou klesající exponenciály.

Graf pravděpodobností úhynu (obrázek 20.) je velmi závislý na dávce. Můžeme zde vidět, jak například v šedesátém úseku pro 4. třídu umírá 55% ryb, kdežto při podmínkách třídy 6. přežívá až 85% ryb.

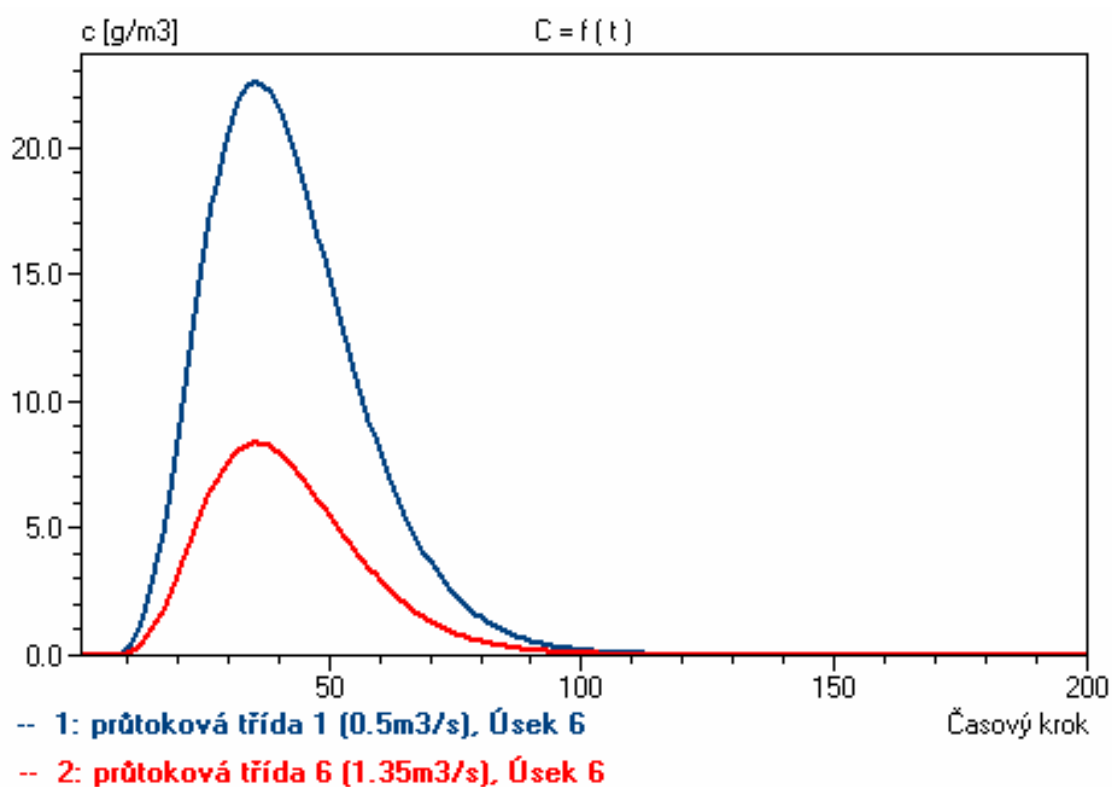
Konečným výsledkem je graf průměrné pravděpodobnosti (obrázek 21.). Podle váhy jednotlivých tříd, dané počtem dní zastoupení v roce, jsou pravděpodobnosti zprůměrovány. Pokud nasimulujeme model také pro další oblasti, můžeme potom podle tohoto grafu posoudit celkové riziko havárie v těchto místech a případně přijmout určitá opatření.

Tabulka 1. Část tabulky objemů z tabulkového procesoru Calc.

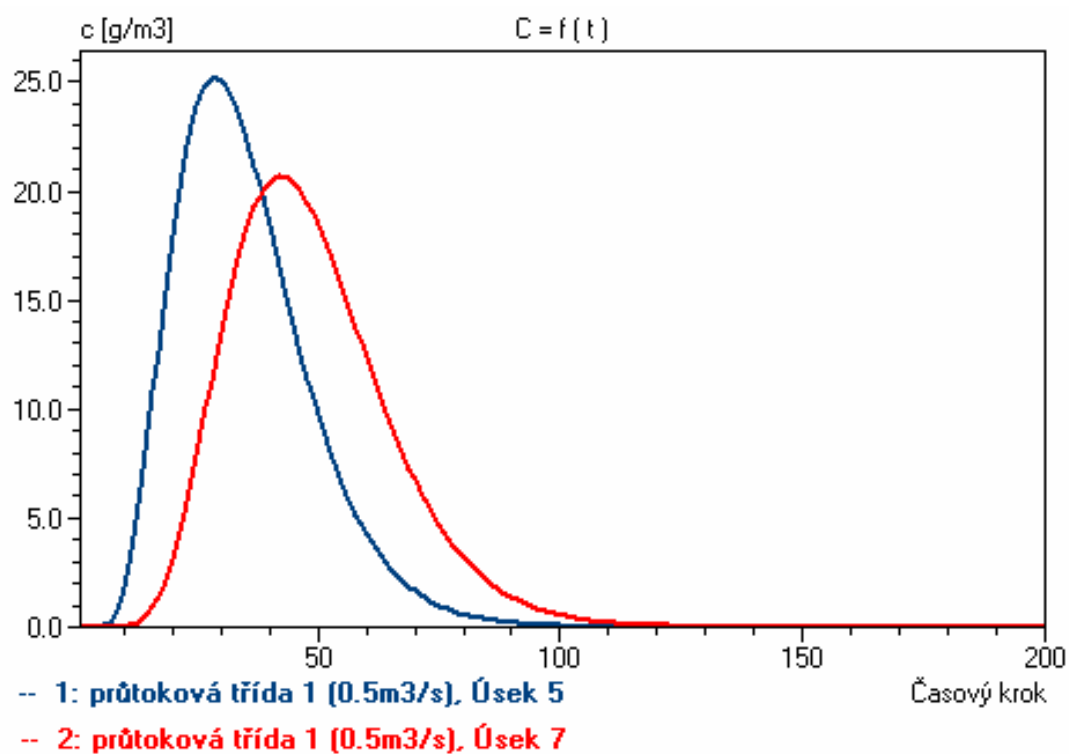
Cislo useku:	Trida prutoku1	Trida prutoku2	Trida prutoku3	Trida prutoku4	Trida prutoku5
0	7.5	8.25	10.5	13.5	16.5
1	50	55	70	90	110
2	50.15	55.17	70.21	90.27	110.33
3	50.3	55.33	70.42	90.54	110.66
4	50.45	55.5	70.63	90.81	110.99
5	50.6	55.66	70.84	91.08	111.33
6	50.75	55.83	71.06	91.36	111.66
7	50.91	56	71.27	91.63	111.99
8	51.06	56.17	71.48	91.91	112.33
9	51.21	56.33	71.7	92.18	112.67
10	51.37	56.5	71.91	92.46	113.01
11	51.52	56.67	72.13	92.74	113.34
12	51.67	56.84	72.34	93.01	113.68
13	51.83	57.01	72.56	93.29	114.03
14	51.99	57.18	72.78	93.57	114.37
15	52.14	57.36	73	93.85	114.71
16	52.3	57.53	73.22	94.14	115.06
17	52.45	57.7	73.44	94.42	115.4
18	52.61	57.87	73.66	94.7	115.75
19	52.77	58.05	73.88	94.99	116.09
20	52.93	58.22	74.1	95.27	116.44
21	53.09	58.4	74.32	95.56	116.79
22	53.25	58.57	74.54	95.84	117.14
23	53.41	58.75	74.77	96.13	117.49
24	53.57	58.92	74.99	96.42	117.85
25	53.73	59.1	75.22	96.71	118.2
26	53.89	59.28	75.44	97	118.55
27	54.05	59.45	75.67	97.29	118.91
28	54.21	59.63	75.9	97.58	119.27
29	54.37	59.81	76.12	97.87	119.62
30	54.54	59.99	76.35	98.17	119.98
31	54.7	60.17	76.58	98.46	120.34
32	54.87	60.35	76.81	98.76	120.7
33	55.03	60.53	77.04	99.05	121.07
34	55.2	60.71	77.27	99.35	121.43
35	55.36	60.9	77.51	99.65	121.79
36	55.53	61.08	77.74	99.95	122.16
37	55.69	61.26	77.97	100.25	122.53



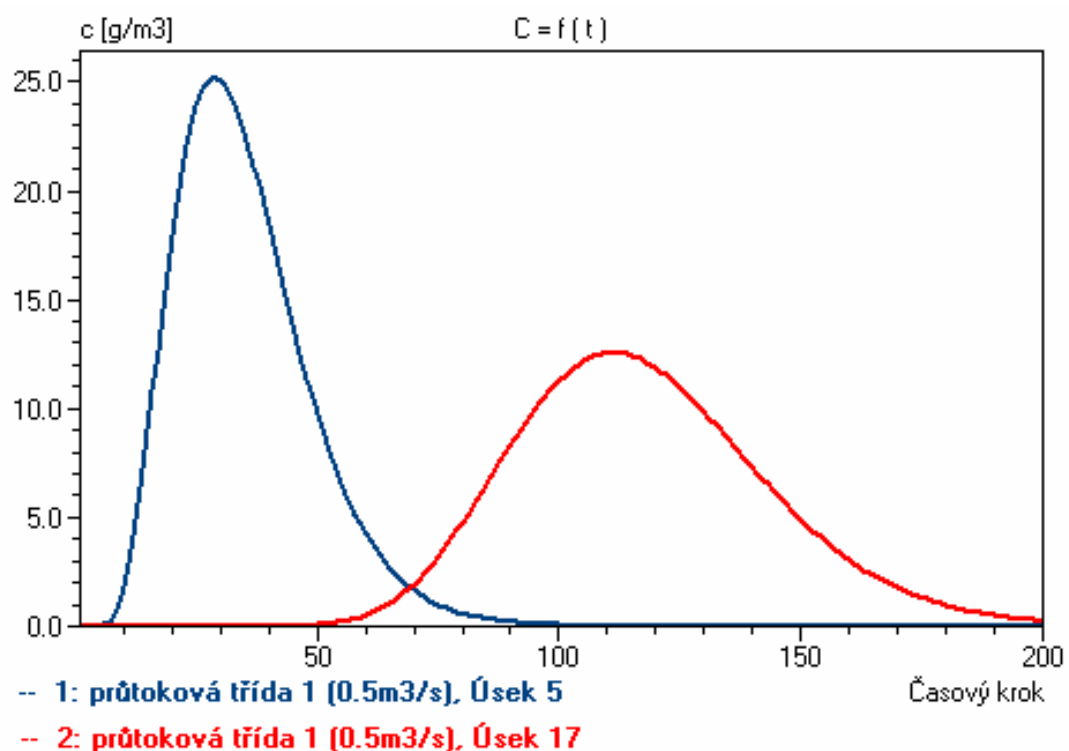
Obrázek 15. Koncentrace čpavku v prvním úseku pro 1. a 6. průtokovou třídu.



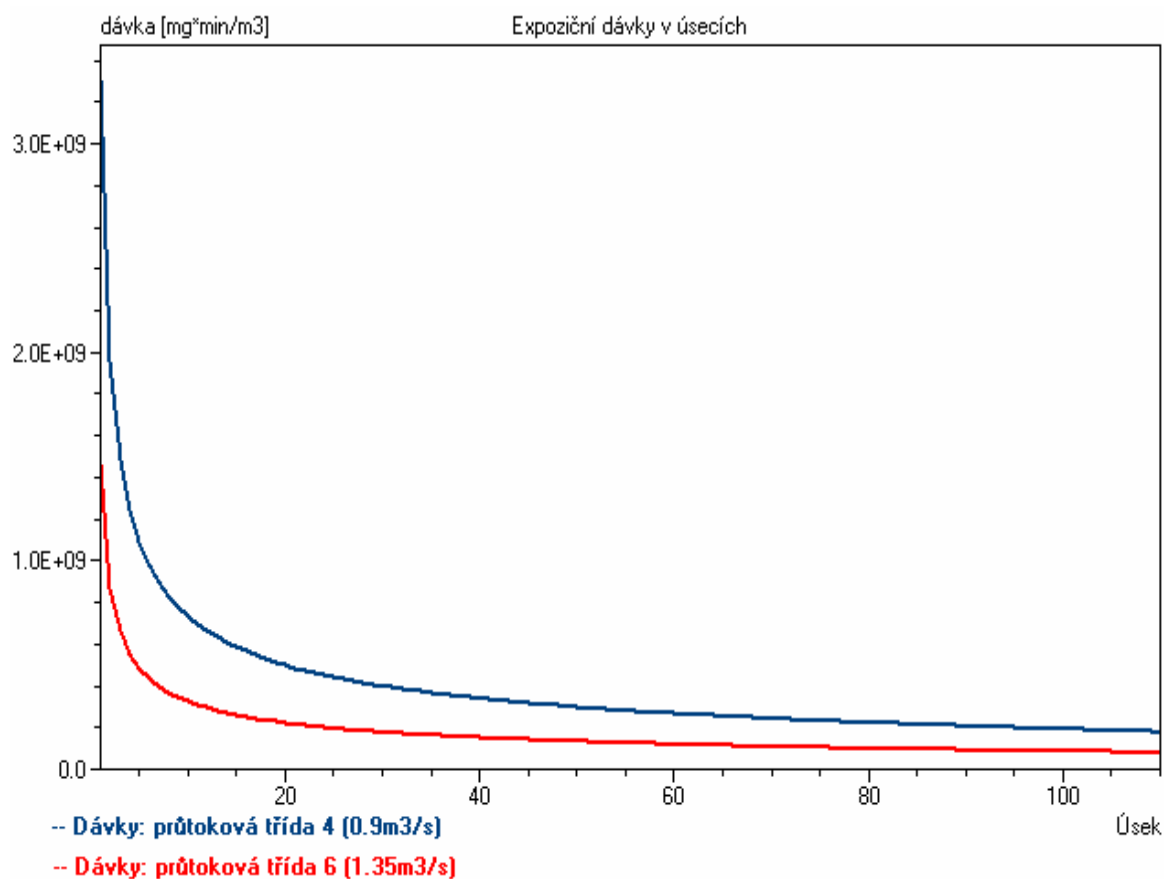
Obrázek 16. Koncentrace čpavku v šestém úseku pro 1. a 6. průtokovou třídu.



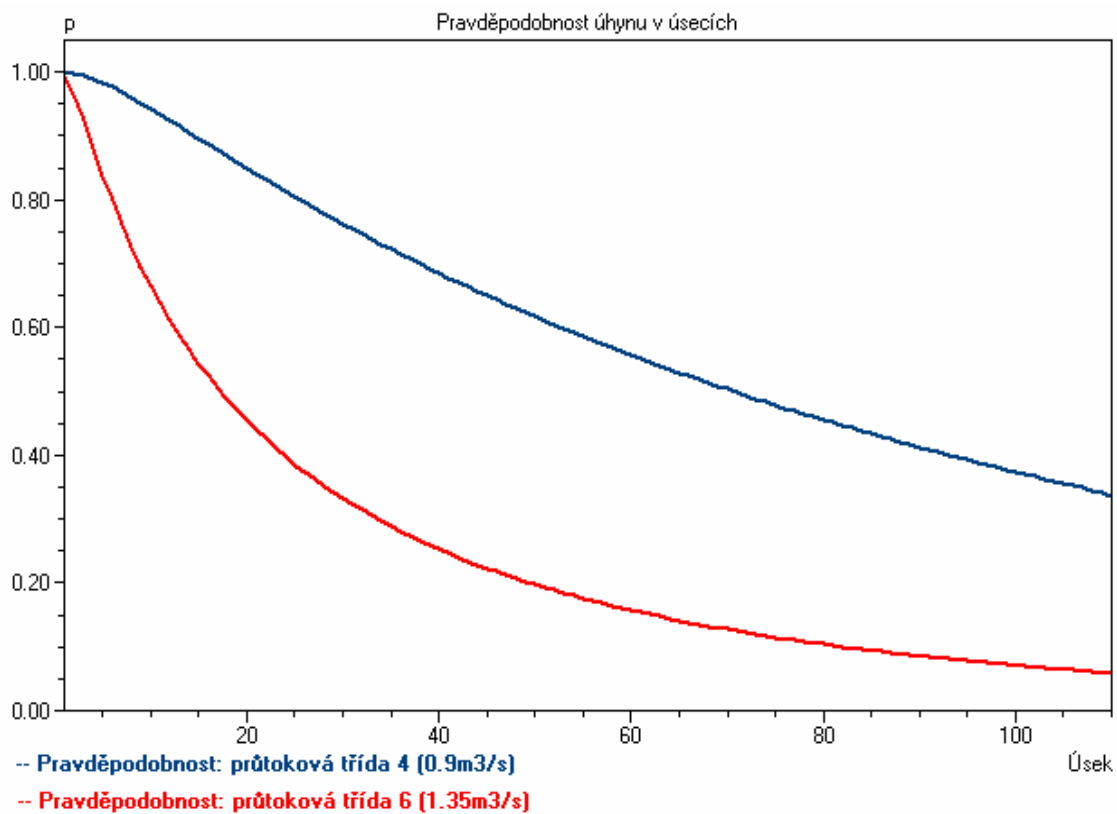
Obrázek 17. Koncentrace pro 1. třídu v úsecích 5 a 7.



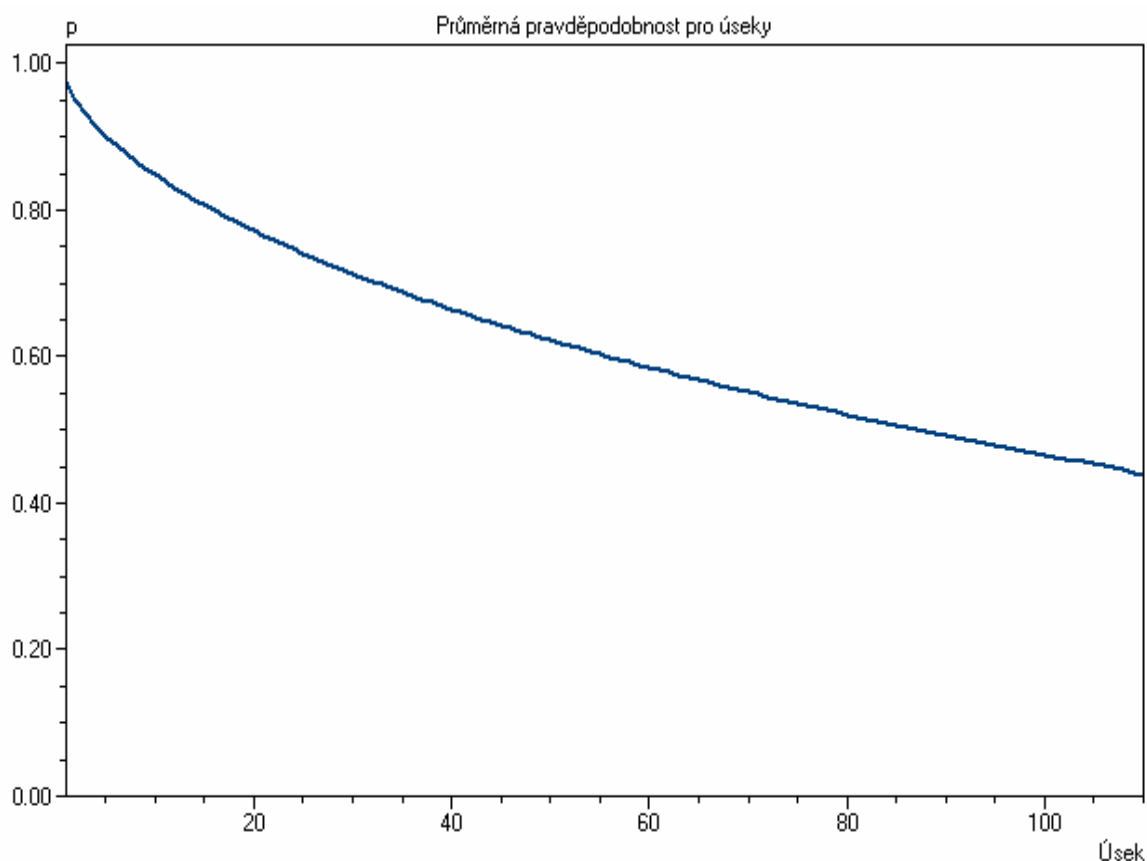
Obrázek 18. Koncentrace pro 1. třídu v úsecích 5 a 17.



Obrázek 19. Graf dávek pro průtokovou třídu 1. a 6.



Obrázek 20. Graf Pravděpodobností úhynu pro průtokovou třídu 4. a 6.



Obrázek 21. Graf průměrné pravděpodobnosti úhynu pro úseky.

Tabulka 2. Část tabulky pravděpodobností generované programem Calc.

Cislo Úseku:	Trida prutoku1	Trida prutoku2	Trida prutoku3	Trida prutoku4	Trida prutoku5	Trida prutoku6
1	1	1	1	1	1	0.99
4	1	1	1	0.99	0.96	0.88
6	1	1	1	0.98	0.92	0.8
8	1	1	0.99	0.96	0.88	0.73
11	1	1	0.99	0.93	0.82	0.64
14	1	1	0.98	0.91	0.77	0.56
18	1	0.99	0.97	0.87	0.71	0.49
22	1	0.99	0.95	0.83	0.65	0.43
26	0.99	0.99	0.94	0.8	0.6	0.37
31	0.99	0.98	0.92	0.75	0.55	0.32
36	0.99	0.98	0.9	0.71	0.5	0.28
42	0.98	0.97	0.88	0.67	0.45	0.24
48	0.98	0.96	0.85	0.63	0.41	0.21
54	0.97	0.95	0.83	0.59	0.37	0.18
60	0.96	0.94	0.8	0.56	0.34	0.16
66	0.96	0.93	0.78	0.52	0.31	0.14
72	0.95	0.92	0.76	0.49	0.28	0.12
78	0.94	0.9	0.73	0.46	0.26	0.11

Tabulka 3. Část tabulky průměrné pravděpodobnosti generované programem Calc.

Usek	Pravdepodobnost	Usek	Pravdepodobnost
1	0.98	53	0.61
2	0.95	55	0.6
3	0.93	57	0.6
4	0.92	58	0.59
5	0.9	60	0.59
6	0.89	61	0.58
7	0.88	62	0.58
8	0.87	63	0.57
9	0.86	65	0.57
10	0.85	66	0.56
11	0.84	68	0.56
12	0.83	69	0.55
13	0.82	70	0.55
15	0.81	72	0.55
16	0.8	73	0.54
18	0.79	75	0.54
19	0.78	77	0.53
21	0.77	78	0.53
22	0.76	80	0.52
23	0.75	81	0.52
25	0.74	83	0.51
27	0.73	85	0.51
28	0.72	86	0.5
29	0.72	88	0.5
30	0.71	90	0.49
31	0.71	92	0.49
32	0.7	93	0.48
33	0.7	95	0.48
34	0.69	96	0.48
36	0.68	97	0.47
37	0.68	99	0.47
38	0.67	100	0.47
39	0.67	102	0.46
40	0.66	103	0.46
42	0.66	105	0.45
43	0.65	106	0.45
45	0.64	107	0.45
47	0.63	108	0.44
48	0.63	110	0.44
49	0.63		
50	0.62		
52	0.61		

4 Závěr

Úkolem bakalářské práce bylo vytvořit nástroj pro posouzení možných následků úniku ve vodě rozpustné toxické látky. Program Kontaminace, který jsem vytvořil, je odpovědí na tento úkol. I přes některé nedokončené funkce je v základu funkční a zvládne všechny zadáním požadované aplikace.

Program obsahuje vstupní část, kde lze zadat všechny potřebné údaje a parametry, která je logicky rozdělena pomocí záložek.

Jsou implementované všechny zadané výpočty, včetně ošetření přetečení úseku, výpočtu expozičních dávek, probitu a implementace probitové funkce. Navíc obsahuje i kontrolu hmotnostní bilance v toku, kde můžeme ověřit správnost výpočtu koncentračního pole.

Díky balíku SDL Suite Light Edition pro Delphi™ 7.0 jsem vytvořil funkční, reprezentativní, přehledné, pomocí kurzoru dobře odečítatelné, snadno nastavitelné a intuitivní grafy koncentrací, dávek, pravděpodobností a celkové pravděpodobnosti. Ty lze v podobě bitmap uchovávat a porovnávat s ostatními modely a pomocí nich vyhodnocovat riziko případných havárií v daných lokalitách.

Program byl otestován na řešení praktické úlohy – znečištění vodního toku čpavkem. Výsledky ukazují, že relativně malé množství může mít pro malý tok velmi závažné následky, zejména v době malého průtoku.

Program tedy lze využít pro studijní a výukové účely, ale také by své místo našel i ve společnostech, či institucích zabývajících se přepravou nebezpečných látek jako pomůcka při plánování tras transportu těchto chemikálií.

Program lze dále rozšiřovat o další funkce. Například o grafické zobrazení koncentračního pole, o dynamické znázornění pohybu chemikálie v toku pomocí koncentračního pole. Editor látek by mohl plnit funkci manažeru databáze látek a jejich parametrů. Za pomoci plné verze SDL Suite lze implementovat možnost zobrazení až šestnácti křivek v grafech téměř bez omezení počtu vynesných bodů.

Práce na tomto úkolu pro mě byla zajímavá jak z hlediska programátorského tak z hlediska dané problematiky. Nevylučuji samostatnou iniciativu v dalších úpravách a rozšiřování programu Kontaminace.

5 Použitá literatura

- [1.] American Institute of Chemical Engineers. *Guidelines for chemical process quantitative risk analysis*. 2000. 754 s.
- [2.] *Amoniak* [online]. 2006 [cit. 2007-07-18]. Dostupný z WWW: <cs.wikipedia.org/wiki/Amoniak>.
- [3.] *Canadian Centre for Occupational Health and Safety* [online]. 2005 [cit. 2007-07-13]. Dostupný z WWW: <Canadian Centre for Occupational Health and Safety>.
- [4.] *Faktory ovlivňující rozpustnost látek* [online]. 2007 [cit. 2007-07-08]. Dostupný z WWW: <www.kavalirka.cz/download/upload/kavalirka_1164486428_31.pdf>.
- [5.] *Koncentrace* [online]. 2006 [cit. 2007-07-09]. Dostupný z WWW: <[cs.wikipedia.org/wiki/Koncentrace_\(chemie\)](http://cs.wikipedia.org/wiki/Koncentrace_(chemie))>.
- [6.] Novák, J.: Management environmentálních rizik - Metodologie problematiky. Interní zpráva TUL, prosinec 2006, FM/KMO/F/Z/06/20
- [7.] Novák, J.: Problematika vyhodnocení rizika při úniku toxického plynu z mobilního zdroje. Interní zpráva TUL, prosinec 2006, FM/KMO/F/Z/06/21.
- [8.] *Probit* [online]. 2006 [cit. 2007-07-10]. Dostupný z WWW: <en.wikipedia.org/wiki/Probit>.
- [9.] *Substance Prioritisation for the Possible Future Development of EU Acute Exposure Toxicity* [online]. 2003 [cit. 2007-07-10]. Dostupný z WWW: <[1.] circa.europa.eu/Public/irc/jrc/acutex/library?l=/workshops_2003-2005/acutex_workshop/sra-abs_hsepdf/_EN_1.0_&a=d>.
- [10.] Testy NH₃ [online]. 2005 [cit. 2007-07-20]. Dostupný z WWW: <www.aquar.cz/testy.html>.